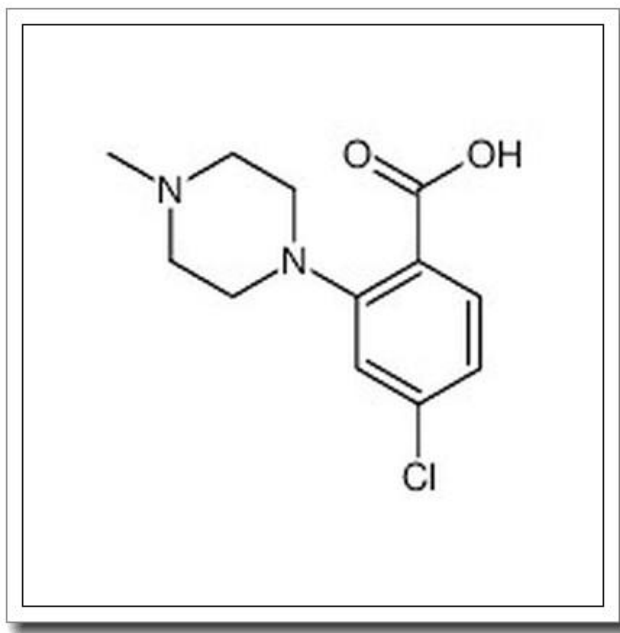


2-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-氯苯甲酸

4-Chloro-2-(4-methyl-1-piperazinyl)benzoic acid



产品基本信息

属性	值
化学名称	4-Chloro-2-(4-methyl-1-piperazinyl)benzoic acid
中文名称	2-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-氯苯甲酸
CAS 号	1197193-44-4
分子式	C ₁₂ H ₁₅ ClN ₂ O ₂
分子量	254.713
纯度	>96%

产品说明

2-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-氯苯甲酸产品说明书

1. 产品概述与化学特性

2-(4-甲基-1-哌嗪基)-4-氯苯甲酸 (CAS 号 1197193-44-4) 是一种含哌嗪环的氯代苯甲酸衍生物, 分子式为 $C_{12}H_{15}ClN_2O_2$, 分子量 254.713。该化合物为白色至类白色结晶性粉末, 纯度 >96%, 兼具芳香羧酸与叔胺基团的特性, 可溶于有机溶剂如 DMSO 和甲醇, 微溶于水。其结构中的氯原子与哌嗪基团赋予分子独特的电子效应和空间位阻, 是药物化学中常见的药效团修饰片段。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为杂环羧酸类中间体, 可通过哌嗪基团参与氢键形成和分子识别, 同时苯甲酸结构提供金属配位能力。其氯原子的引入增强了疏水性, 可能影响细胞膜穿透性。在生物活性分子设计中, 此类结构常作为激酶抑制剂或 GPCR 配体的核心骨架, 对调节蛋白质-蛋白质相互作用具有潜在价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域: 1) 作为抗精神病药物或抗菌剂的合成前体; 2) 用于构建 DNA 拓扑异构酶抑制剂的苯甲酸衍生物片段; 3) 在放射性标记探针开发中作为配体连接单元。实验室级用途包括有机合成教学演示哌嗪 N-烷基化反应, 以及作为 HPLC 定性分析的对照品。

4. 储存条件与使用建议

建议储存于 -20°C 干燥避光环境, 充氮密封保存。开封后需在干燥器中恒重, 避免吸湿。使用时应佩戴防护手套和护目镜, 通风橱中操作。溶解推荐使用预纯化的 DMSO (浓度 < 10mM), 水溶液需现配现用。长期保存建议分装并标注开瓶日期。

5. 质量控制与安全信息

本产品经 HPLC 检测纯度 >96% (面积归一化法), 残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。MSDS 显示其急性毒性类别为 4 ($LD_{50} > 2000\text{mg/kg}$), 但可能引起眼睛和皮肤刺激。

废弃物处理需遵守当地法规，不可直接排入下水道。运输分类为非危险化学品，但建议附带 GHS07 警示标识（感叹号标志）。

注：具体实验方案请结合文献方法优化，本说明数据基于批次 QC 报告，不同批次可能存在工艺差异。